相分離過程の相関関数に対する統計的条件

京都大学教養部　　冨田博之

相分離過程の後期段階、すなわちスケイリング則が成り立つと思われる段階は

(1)なめらかで　(2)ランダムな　(3)界面系

と規定することができる。すなわち、(3)既に半巨視的な界面が形成されているが、(2)初期状態の一様性は、非均質になっても、まだマクロには維持されていなければならず、また、(1)いずれ $t\to\infty$ でなめらかになるはずであるから、相似則の考えから、すでになめらかになっているべきである。このような系の統計的な性質を調べてみる。

(Ⅰ)相関関数の対称性と特異性

系の秩序変数の相関関数 $g(r)$ は、秩序変数のとる値を $\rho=0,1$、また単位体積あたりの界面の面積を A、体積組成比を ϕ として、以下のような対称性と特異性を持つことを示すことができる。[1),2)]

$$g(r)=\phi(1-\phi)-(\gamma_d/4)ArG(r)\qquad(\gamma_d=4/\pi,1\ \text{for}\ d=2,3)\tag{1}$$

$$G(r)=r\text{の偶関数},\ G(0)=1,\ G'(0)=0\tag{2}$$

すなわち

$$\lim_{r\to 0}[\nabla^2 g(r)+(d-1)\gamma_d A/4r]=0\tag{3}$$

あるいは、構造関数

$$S(q)=\int dr\ e^{iq\cdot r}g(r)\tag{4}$$

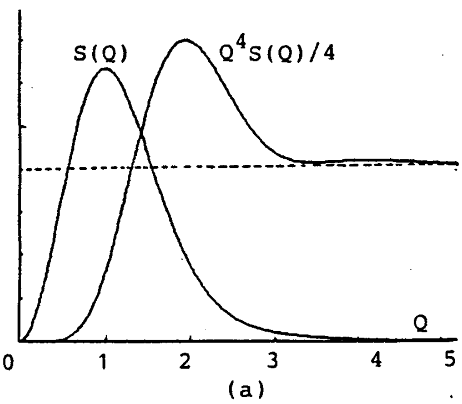
$$(2\pi)^{-d}\int dq\ S(q)=\phi(1-\phi)\tag{5}$$

を用いれば

$$\lim_{q\to\infty}q^{d+1}S(q)=\beta_d A\qquad(\beta_d=2,2\pi\ \ \text{for}\ \ d=2,3)\tag{6}$$

$$\int_0^\infty[q^{d+1}S(q)-\beta_d A]\,dq=0\tag{7}$$

となる。(6)はよく知られたPorod則で、界面で秩序変数が不連続な飛びを持つことに対応した特異性である。和則(7)は界面がなめらかであるという条件に対応する。(7)は、Porodプロット、すなわち q vs $q^{d+1}S(q)$



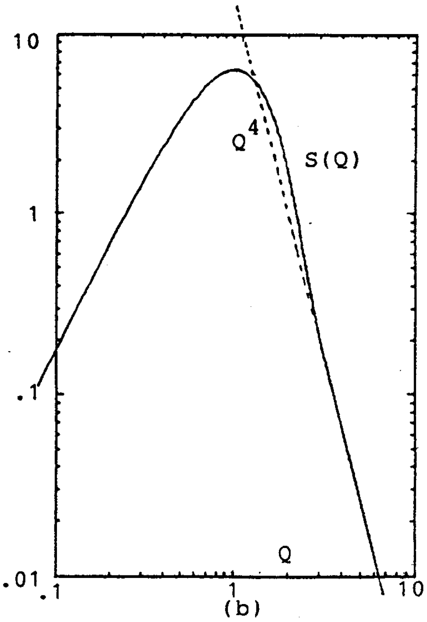


図1 (a)構造関数とPorodプロット↑
および (b)log-logプロット→
[液滴系の拡散ー融合モデルに基づくもので、ϕ=0.1 とした。(Ref.3)
S(Q)のピーク位置が Q=1 となるようにスケイルしてある。]

プロットをとれば、$q\to\infty$のPorodレベルを中心に等面積則が成り立つことを示している。すなわち、なめらかな界面系では、PorodプロットでPorod則が成り立つ前に、著しいピークが現れるはずである。図は文献３にもとずいて、球状液滴系について計算したものであるが、この系はあきらかになめらかな系であって、(7)が成り立っている。図(b)のlog-logプロットではこの事情はあまり鮮明ではない。図(b)ではＳ（ｑ）のピークを少し過ぎたあたりから、すでにq^{-4}則が成り立っていると判断できないこともない。少なくともlog-logプロットで「q^{-4}則が成り立っている」と結論できるだけの精度のよい実験データが得られているのなら、当然Porodプロットをとることも可能なはずで、もしこれができないなら「q^{-4}則が成り立っている」という結論もあやしいと言わねばならないだろう。

（II）なめらかでランダムな界面系の特性長

相関関数および構造関数に対し以下のような展開形を得ることができる。

$$g(r)=\phi(1-\phi)-(\gamma_d/4)Ar\left[1-(d-1)r^2/24R_m^2+...\right] \tag{8}$$

$$S(q)=\beta_d A q^{-(d+1)}\left[1+(d^2-1)/8R_m^2 q^2+...\right] \tag{9}$$

R_m^{-2}はEulerの法曲率を法線ベクトルのまわりに２乗平均したものを、界面全体について平均した量で、R_mはひとつの特性長（平均的な曲率半径）を与える。これを用いると、Porod則の成り立つ範囲は$q>R_m^{-1}$となる。また(9)を用いて

$$(2\pi)^{-d}\int_0^{D^{-1}} dq\ S(q)=\phi(1-\phi)/2 \tag{10}$$

により、もうひとつの特性長

$$D\cong\pi\phi(1-\phi)/2A \tag{11}$$

を定義することができる。D^{-1}はＳ（ｑ）の支配的部分、例えばピーク位置に対応する波数といえるが、よく分離したクラスター系ならば、Ｄが平均的なクラスターの大きさを与えることは定義からあきらかであろう。$\phi\ll1$でクラスターが球状と考えられる時は、$R_m\sim D$であるとしてよいが、クラスターが入り組んで$R_m\ll D$となってくると、Porod則が成り立つ範囲$q>R_m^{-1}$はＳ（ｑ）の支配的部分（$q\sim D^{-1}$）から遠ざかり、次のベキ$q^{-(d+3)}$が顕著になるであろう。これは、$\phi\sim1/2$で報告されているスケイリング則の交替現象[4]を説明している。ピーク位置の時間依存性$q_{max}\sim t^a$についても、初期段階はクラスターの拡散－融合過程[5],[6]で、$a=1/6$ (or 1/5)、後期段階はバーコレイティングな、入り組んだ界面が蒸発－凝縮によりなめらかになっていく過程[7]で、$a\sim1/3$と考えられる。

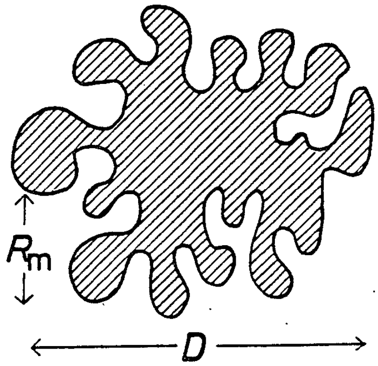


図2

上記の展開形のもうひとつの応用は確率場（random field）の幾何学的諸量[8]の期待値の計算である。

Ｘ（ｒ）をｄ次元ユークリッド空間におけるスカラー確率場として

Excursion Set　$V(u)=\{r\mid X(r)\geqq u\}$

Boundary Set　$\partial V(u)=\{r\mid X(r)=u\}$

により、ランダムな界面系の確率論的モデルが定義できる。典型的な例としてガウス確率場の場合には、Ｖ、∂Vの測度（の密度）の期待値ϕ、Ａや、∂Vの曲率の平均などの幾何学的量を、相関関数の展開から比較的簡単に計算することができる。[2]

（III）界面系におけるパーコレイションの問題

$\phi \sim 1/2$では、クラスターはくっつきあって端から端までつながると予想される（パーコレイション）。しかし、純粋に界面系の統計という立場からは事情はそれほど自明ではない。たとえば、反発的でさえあれば、分離した球状のクラスターで任意の体積組成比ϕの系を形成できることは明らかであろう。

なめらかな界面系のパーコレイションの問題を考察する際に、以下の命題を第零近似として用いることができるのではないだろうか。（命題というほど大げさなものではなくて、ほとんど自明に近い）

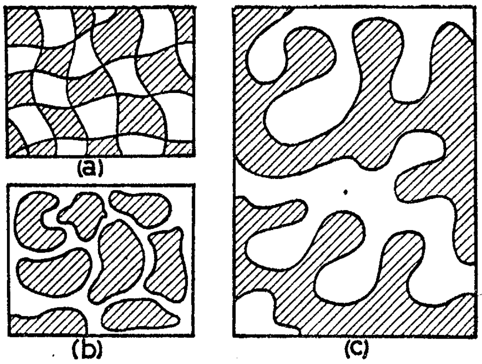


図３　(a)なめらかでない、(b)自己相補的でない、(c)なめらかで、自己相補的

1）なめらかな界面系で分離された２相の、少なくとも一方の相（母相）はパーコレイティングである。

2）したがって、（統計的に）自己相補的な系では２相ともパーコレイティングである。

統計的に自己相補的な系としては、50%-50%の対称的な合金や、磁場のないイジング系があげられ、決して例外的なものではない。また、秩序変数非保存系であるが太田達が扱った系[9]もこれに相当し、パーコレイティングであるといえる。なめらかで自己相補的という条件がどちらも重要であることは図３を見ればあきらかであろうが、必ずしも必要条件ではない。パーコレイティングな対称相を、トポロジーを保ったまま連続的に変形することは常に可能である。おそらく、正負の曲率が同じ割合で分布していることが最も重要と思われるが、これ以上の考察はまだ行っていない。

（参考文献）

1) H.Tomita, Prog.Theor.Phys.72(1984),656.

2) H.Tomita, Prog.Theor.Phys.75(1986),No.3(in press).

3) H.Tomita, Prog.Theor.Phys.71(1984),1405.

4) S.Katano and M.Iizumi, Phys.Rev.Lett.52(1984),835.

5) K.Binder and D.Stauffer, Phys.Rev.Lett.33(1974),1006.

6) H.Tomita, Prog.Theor.Phys.56(1976),1661.

7) K.Kawasaki and T.Ohta, Physica A118(1983),175.

8) R.J.Adler, 'The Geometry of Random Field',(John-Wiley and Sons,1980)

9) T.Ohta,D.Jasnow and K.Kawasaki, Phys.Rev.Lett.49(1982),1223.